

一般 Gauss—Markov 模型下最小二乘估计是最佳估计的充要条件*

林 春 土

(浙江大学, 杭州 310027)

考虑一般的 Gauss—Markov 模型如下

$$M = \{y, X\beta, \sigma^2 V\},$$

其中 y 是 $n \times 1$ 的观察值向量, 它的期望是 $E(y) = X\beta$, 协方差阵是 $D(y) = \sigma^2 V$, 这里 X 是 $n \times p$ 阶已知矩阵, β 是 $p \times 1$ 的未知参数向量, V 是 $n \times n$ 阶已知的非负定矩阵, $\sigma^2 > 0$ 是未知参数. 本文不须对矩阵 X 和 V 的秩作任何假设.

如果我们用符号 $P_y = \text{BLUE}(X\beta)$ 表示线性统计量 P_y 是 $X\beta$ 的最佳线性无偏估计, 即在模型 M 下, 满足 $E(P_y) = X\beta$, 而且对一切满足 $E(G_y) = X\beta$ 的 G_y , 都有 $D(P_y) \leq D(G_y)$, 这里符号 $A \leq B$ 表示 $B - A$ 为非负定的 (或记为 $B - A \geq 0$). 那么, 众所周知, 当 $V = I$ 单位阵时, 即在模型 $M_0 = \{y, X\beta, \sigma^2 I\}$ 下, 有 $P_{xy} = \text{BLUE}(X\beta)$, 其中 $P_x = X(X'X)^-X'$, 而 A^- 是满足 $AA^-A = A$ 的任意广义逆. 称 P_{xy} 为最小二乘估计. 然而, 当 $V \neq I$ 时, 在一般的模型 $M = \{y, X\beta, \sigma^2 V\}$ 下, 最小二乘估计 P_{xy} 并不是最佳估计. Anderson (1948) 最早提出 P_{xy} 在一般模型 M 下的优良性问题^[1]. 此后, 这问题一度成为统计学家研究的热门问题之一, 大量的研究论文集中于研究最小二乘估计在 M 下是最佳线性无偏估计的条件. 早期这方面的代表作是 Zyskind (1967) 的结果^[2], 他在这篇文章中总结出在 M 下, $P_{xy} = \text{BLUE}(X\beta)$ 的八条等价的充要条件. 以后的许多文献从代数或几何的角度, 也给出一些优美的充要条件, 例如, [3]—[6] 都给出许多独特的结果, 值得一提的是 Baksalary 和 Puntanen (1990) 的文章^[7], 他们得出, 在 $M = \{y, X\beta, \sigma^2 V\}$ 下, $P_{xy} = \text{BLUE}(X\beta)$ 的充要条件是如下二条等价的条件之一成立:

$$(a) D(P_{xy}) \leq D(y), \quad (b) r(V - P_x V P_x) = r(V) - r(P_x V P_x).$$

其中 $r(A)$ 表示矩阵 A 的秩. 因为 $D(y) = V$ 和 $D(P_{xy}) = P_x V P_x$, 于是, 令人感到兴趣的是, 结果 (a) 说明, 在模型 M 下, P_{xy} 是否是 $X\beta$ 的 BLUE, 无须和一切线性无偏估计量作协方差阵的比较, 只要和观察值向量 y 作比较 (当然, y 也是一个线性无偏估计); 而条件 (b) 则把最小二乘估计 P_{xy} 在 M 下是否最佳问题化为 $D(y)$ 和 $D(P_{xy})$ 二个矩阵之秩的可减性问题. 这样二个结果是解决最小二乘估计优良问题很有启发意义的结果.

本文采用线性子空间 $\mu(X; V)$ 的分解, 这里 $\mu(A)$ 表示由矩阵的列向量张成的子空间, 对于模型 M , 总存在如下分解 $\mu(X; V) = \mu(X; VZ) = \mu(X) \oplus \mu(VZ)$, 其中 Z 是满足 $X'Z = 0$ 且 $r(Z) = n - r(X)$ 的矩阵, 而符号 $\oplus$ 表示线性子空间的直接和. 我们在定理 1 中得到在模型 M 下, P_{xy}

* 1991 年 4 月 15 日收到. 1993 年 4 月 14 日收到修改稿.

$=\text{BLUE}(X\beta)$ 的充要条件为 $\mu(X;V)=\mu(X)+\mu(VZ)$, 其中符号表示空间的正交和. 本文的第二个定理中, 我们用关于矩阵 X 的广义逆的种种不变性, 来表征最小二乘估计的优良性质.

为了以后证明方便起见, 先给如下二个引理:

引理 1 在模型 $M=\{y, X\beta, \sigma^2V\}$ 下, 则

$$y \in \mu(X;V), \quad \text{以概率为 1 成立.} \quad (1)$$

证明 对任意的 $n \times 1$ 向量 α , 如果 $\alpha \perp \mu(X;V)$, 那么必有 $\alpha'X=0$, 且 $\alpha'V=0$, 于是就得到 $E(\alpha'y)=\alpha'X\beta=0$, 且 $\text{Var}(\alpha'y)=\alpha'V\alpha=0$. 因此, $\alpha'y=0$ 以概率 1 成立, 即以概率 1 成立 $y \in \mu(X;V)$.

引理 2 有模型 $M=\{y, X\beta, \sigma^2V\}$ 下, 则有

$$(a) \quad \mu(X;VZ)=\mu(X) \oplus \mu(VZ); \quad (2)$$

$$(b) \quad \mu(X;V)=\mu(X;VZ). \quad (3)$$

证明 如果有 $n \times 1$ 向量 $\alpha \in \mu(X) \cap \mu(VZ)$, 那么存在向量 t_1 和 t_2 , 使得 $\alpha = Xt_1 = VZt_2$, 于是有 $t_2Z'Xt_1 = t_2Z'VZt_2 = 0$, 只有 $\alpha = VZt_2 = 0$. 所以 $\mu(X) \cap \mu(VZ) = \{0\}$. (a) 证完.

现在证(b). 显然地, $\mu(X;VZ) \subset \mu(X;V)$, 故只要证 $r(X;VZ)=r(X;V)$ 就可以. 因为由(a), 可得 $r(X;V)=r(X)+r[(I-XX^-)V]=r(X)+r(Z'V)=r(X)+r(VZ)=r(X;VZ)$.

由(2)和(3)可见, 当 $V=I$ 时, 在模型 $M_0=\{y, X\beta, \sigma^2I\}$ 下, 有

$$y \in \mu(X;Z) = \mu(X) + \mu(Z), \quad (\text{a.s.}) \quad (4)$$

而在一般模型 $M=\{y, X\beta, \sigma^2V\}$ 下, 我们得出

$$y \in \mu(X;VZ) = \mu(X) \oplus \mu(VZ), \quad (\text{a.s.}) \quad (5)$$

注意到(4)和(5)之差异是观察值向量 y 的空间分解形式, 前者是正交分解, 而后者只是直接和分解. 然而, 在 M_0 之下, 成立 $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$. 下面我们给出更一般的结果.

定理 1 在 $M=\{y, X\beta, \sigma^2V\}$ 下, 如下三个条件是等价的:

$$(a) \quad P_X y = \text{BLUE}(X\beta). \quad (b) \quad \mu(X;VZ) = \mu(X) + \mu(VZ). \quad (c) \quad \mu(Z;VX) = \mu(Z) + \mu(VX).$$

证明 显然, $E(P_X y) = X\beta$. 因此, 在 M 下, $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$ 当且仅当

$$\text{Cov}(P_X y, Z'y) = P_X V Z \sigma^2 = 0,$$

易知 $P_X V Z = 0 \Leftrightarrow X' V Z = 0 \Leftrightarrow \mu(VZ) \subset \mu(Z) \Leftrightarrow (b)$ 成立. 故 $(a) \Leftrightarrow (b)$.

同理, 由于 $X' V Z = 0 \Leftrightarrow Z' V X = 0 \Leftrightarrow \mu(VX) \subset \mu(X) \Leftrightarrow (c)$ 成立. 定理 1 完全证毕.

为了给出定理 2, 再给如下引理 3, 其证明见[8].

引理 3 设 A 和 B 是二个同列矩阵, 那么有

$$r \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = r(A) + r[B(I - A^-A)] = r(B) + r[A(I - B^-B)].$$

记 $A\{1, 4\} = \{A_m^- : AA_m^-A = A, (A_m^-)' = A_m^-\}$. 得到 $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$ 的一系列等价条件如下:

定理 2 在 $M=\{y, X\beta, \sigma^2V\}$ 下, 那么如下十一个条件是等价的:

$$(a) \quad P_X y = \text{BLUE}(X\beta). \quad (b) \quad \mu(VX) \subset \mu(X). \quad (c) \quad \text{存在矩阵 } K, \text{ 使 } VX = XK.$$

$$(d) \quad \mu(X;VX) = \mu(X). \quad (e) \quad r(X;VX) = r(X).$$

$$(f) \quad XX^-VX = VX, \text{ 对任一广义逆 } X^- \text{ 的选择成立.}$$

- (g) $X_{\infty}^{-}VX$ 对每一 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 的选择不变.
 (h) $r(X_{\infty}^{-}VX)$ 对每一个 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 的选择不变.
 (i) $r(X_{\infty}^{-}VX) = r(VX)$ 对每一个 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 的选择成立.
 (j) $\mu[(X_{\infty}^{-}VX)']$ 对每一个 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 的选择不变.
 (k) $\mu[(X_{\infty}^{-}VX)'] = \mu(X'V)$ 对每一个 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 成立.

证明 首先 (a) $\Leftrightarrow X'VZ=0 \Leftrightarrow$ (b), 而且容易看出条件 (b) $\sim$ (f) 都是等价的.

因为对 $X_{\infty}^{-} \in X\{1,4\}$ 的任意选择, $X_{\infty}^{-}X$ 是不变的, 故有 (c) $\Rightarrow$ (g). 而且显然又有 (g) $\Rightarrow$ (h) $\Rightarrow$ (j) 和 (i) $\Leftrightarrow$ (k). 因此, 我们只须证明 (h) $\Rightarrow$ (i) $\Rightarrow$ (c) 就足够了.

令 $r(X) = r$, 并对 X 作奇异值分解如下

$$X = P \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q', \quad (6)$$

其中 $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_r)$, $d_i > 0 (i=1, 2, \dots, r)$ 且 $P'P = I_n$ 和 $Q'Q = I_p$. 易知

$$X_{\infty}^{-} = Q \begin{pmatrix} D^{-1} & E \\ 0 & H \end{pmatrix} P', \quad (7)$$

其中 E 和 H 是任意矩阵. 于是我们得到

$$\begin{aligned} r(X_{\infty}^{-}VX) &= r \left(\begin{pmatrix} D^{-1} & E \\ 0 & H \end{pmatrix} P'VX \right) = r \left(\begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{-1} & E \\ 0 & H \end{pmatrix} P'VX \right) \\ &= r \left(\begin{pmatrix} I & DE \\ 0 & H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \right) = r \begin{pmatrix} A_1 + DEA_2 \\ HA_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8)$$

其中

$$P'VX = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

如果 (h) 成立, 令 $E=0, H=0$ 或 $E=0$, 由 (8) 和引理 3, 得

$$r(X_{\infty}^{-}VX) = r(A_1) = r \begin{pmatrix} A_1 \\ HA_2 \end{pmatrix} = r(A_1) + r[HA_2(I - A_1^{-}A_1)]. \quad (10)$$

只有 $HA_2(I - A_1^{-}A_1) = 0$. 因此, $A_2(I - A_1^{-}A_1) = 0$. 再利用引理 3, 得到

$$r(A_1) = r(A_1) + r[A_2(I - A_1^{-}A_1)] = r \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = r(P'VX) = r(VX). \quad (11)$$

由 (10) 和 (11) 式得到 (h) $\Rightarrow$ (i).

如果 (i) 成立, 令 $E = -D^{-1}A_1A_2^{-}$ 和 $H=0$. 由 (8) 式, 得到

$$\begin{aligned} r(X_{\infty}^{-}VX) &= r(A_1 - A_1A_2^{-}A_2) = r[(A_1(I - A_2^{-}A_2))] \\ &= r \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} - r(A_2) = r(X_{\infty}^{-}VX) - r(A_2). \end{aligned}$$

因此, $A_2=0$. 再由 (9) 式, 得到 $VX = P \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q'Q \begin{pmatrix} D^{-1}A_1 \\ 0 \end{pmatrix} = XK$, 其中 $K = Q \begin{pmatrix} D^{-1}A_1 \\ 0 \end{pmatrix}$,

(i) $\Rightarrow$ (c) 证完.

最后, (h) $\Leftrightarrow$ (j) 和 (i) $\Leftrightarrow$ (k) 都是明显的. 因此, 定理 2 完全证毕.

注解一 条件 (a) 和 (b) 的等价性在早期文献 [2] 就已经得到. 文献 [8] 中讨论线性模型的

可估性时,首次把可估性和矩阵的广义逆选择的不变性等价起来;文献[7]也对最小二乘的统一理论(Unified Theory)给出矩阵广义逆选择的许多等价的不变性条件.本文的(f)~(k)各条件的等价性,则是首次把 $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$ 和 X_m^- 的取法不变性相联系起来.

注解二 由条件(b)和(c),或许容易看出(f)~(k)诸条件的必要性.然而,(f)~(k)各个条件的充分性则是本问题的有趣结果.

注解三 条件(g)~(k),直观上看,似乎是条件的强弱各异,例如,(g) $\Rightarrow$ (h)是显然的,但一般地说,秩的不变性未必有矩阵的不变性.然而,其实质(g)~(k)各条件的不变性却都是等价的.

参 考 文 献

- [1] T. W. Anderson(1948), *On the theory of testing serial correlation*, Skand. Aktuarietidskr. 31:88—116.
- [2] G. Zyskind(1967), *On canonical forms, non-negative covariance and best and simple least squares linear estimators in linear models*, Ann. Math. Statist. 38:1092—1109.
- [3] G. P. H. Styan(1973), *When does least squares give the best linear unbiased estimate?* *Multivariate Statistical Inference*, North-Holland, Amsterdam, pp. 241—246.
- [4] J. K. Baksalary, and R. Kala(1977), *An extension of a rank criterion for the least squares estimator to be the best linear unbiased estimator*, J. Statist. Plann. Inference, 1:309—312.
- [5] S. Puntanen(1987), *On the relative goodness of ordinary least squares estimation in the general linear model*, Acta Univ. Tampere. Ser. A, Vol. 216.
- [6] S. Puntanen, and G. P. H. Styan(1989), *The equality of the ordinary least squares estimator and the best linear unbiased estimator (with discussion)*, Amer. Statist., 43, 153—164.
- [7] J. K. Baksalary, and S. Puntanen(1990), *Characterizations of the best linear unbiased estimator in the general Gauss—Markov model with the use of matrix partial orderings*, Linear Algebra and Its Applications, 127:363—370.
- [8] I. S. Alalouf, and G. P. H. Styan(1979), *Characterizations of estimability in the general linear model*, Ann. of Statist., Vol. 7, No. 1, 194—200.

Necessary and Sufficient Conditions for the Least Squares Estimator to Be the Best Linear Unbiased Estimator in the General Gauss- Markov Model

Lin Chuntu

(Dept. of Math., Zhejiang Univ., Hangzhou)

Abstract

In this paper, we discuss the decomposition of the space $\mu(X : V)$ and the invariance with respect to the choice of a generalized inverse of matrix X in the general Gauss-Markov model. In Theorem 1, we give necessary and sufficient conditions for the least squares estimator $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$ under the general Gauss-Markov model $M = \{y, X\beta, \sigma^2 V\}$. In Theorem 2, we prove that $P_X y = \text{BLUE}(X\beta)$ under model M and invariant with respect to the choice of a generalized inverse of matrix X are equivalent.